



Зависимость скорости межфазного обмена кислорода от давления кислорода для оксида  $\text{La}_2\text{NiO}_{4+\delta}$ .  $T=600\text{--}800\text{ }^\circ\text{C}$ ,  $P^0_{\text{O}_2}=760\text{ Торр}$ .

Зависимость скорости межфазного обмена кислорода от давления кислорода имеет вид степенной функции ( $H \sim P^n_{\text{O}_2}$ ). По наклону прямой в логарифмических координатах рассчитаны показатели степени ( $n$ ). Видно, что с ростом температуры показатель степени уменьшается. По наклону прямой зависимости скорости межфазного обмена от температуры  $\lg(H, \text{ат}\cdot\text{см}^{-2}\cdot\text{с}^{-1}) = f(10^3/T, \text{К}^{-1})$  рассчитаны значения эффективной энергии активации ( $E_a$ , эВ). Показано, что энергия активации уменьшается с ростом давления кислорода с 1.51 до 1.14 эВ.

*Выражаем благодарность н.с., к.х.н. Пикаловой Е.Ю. и инж. Кольчугину А.А за предоставление образца. Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ (№14-03-00414).*

## ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ ПАРАМЕТРЫ АРОМАТИЧЕСКИХ АМИНОКИСЛОТ И БЕНЗОЙНОЙ КИСЛОТЫ

Тюнина В.В.<sup>(1)</sup>, Краснов А.В.<sup>(1)</sup>, Федоров М.С.<sup>(2)</sup>

<sup>(1)</sup> Ивановский государственный химико-технологический университет  
153000, г. Иваново, пр. Шереметевский, д. 7

<sup>(2)</sup> Ивановский государственный университет  
153025, г. Иваново, ул. Ермака, д. 39

Аминокислоты и их производные широко используются как модели биополимеров – полипептидов, протеинов. Сведения о термодинамике сублимации аминокислот важны для описания их состояния в растворах, для расчета энтальпии сольватации. Тем не менее, до сих пор

весьма неполно изучены отдельные аспекты парообразования этих веществ вследствие их термического разложения.

В данной работе использован эффузионный метод Кнудсена с масс-спектрометрическим контролем состава пара, позволяющий проводить измерения при давлениях пара ниже 10 Па и фиксировать начало процесса разложения. Исследование выполнено на модернизированном магнитном масс-спектрометре МИ 1201 при энергии ионизирующих электронов 50 эВ. В качестве стандарта для калибровки установки использовалась бензойная кислота. Отсутствие гистерезисных явлений и обработка температурных зависимостей ионных токов по второму закону термодинамики позволили определить энтальпию сублимации для бензойной кислоты:  $\Delta_{\text{sub}}H^\circ(308) = 90(2)$  кДж/моль, что согласуется с имеющимися литературными значениями и подтверждает надежность получаемых данных. В результате изучения сублимации ароматических аминокислот L-фенилаланина (Phe), L-тирозина (Tyr) и L-триптофана (Trp) показано, что для данных соединений в исследуемом диапазоне температур (390–450 К) достигается состояние равновесия и отсутствуют процессы разложения. Осуществлено приведение полученных энтальпий к стандартным значениям ( $p = 1$  атм,  $T = 298$  К):  $\Delta_{\text{sub}}H^\circ(298) = 160(3)$  кДж/моль для Phe,  $\Delta_{\text{sub}}H^\circ(298) = 187(4)$  кДж/моль для Trp,  $\Delta_{\text{sub}}H^\circ(298) = 202(4)$  кДж/моль для Tyr. Таким образом, присутствие гидроксильной группы и гетероатомов в боковой цепи повышает энтальпию сублимации соединений, увеличивает их термическую стабильность.

Также для бензойной кислоты методом MP2/6-311++G\*\* выполнено теоретическое исследование процесса газозного депротонирования или процесса диссоциации кислоты в газовой фазе ( $\text{AH} \leftrightarrow \text{A}^- + \text{H}^+$ ), который сопровождается изменением энтальпии  $\Delta_f H^\circ(298)$  и энергии Гиббса  $\Delta_f G^\circ(298)$ . Полученные значения хорошо согласуются с экспериментальными, известными из литературы. В дальнейшем, анализ изменений этих величин для различных кислот и их замещенных аналогов позволит выделить эффекты, непосредственно связанные только с влиянием заместителя на протондонорную способность соединений в отсутствие влияния среды.

*Работа выполнена в рамках гос. задания, Проект № 1800.*